

DASK Biblioteksspecifikation M-17

ATOMENERGIKOMMISSIONENS
- 3 OKT. 1960
BIBLIOTEK - RISØ

REGNECENTRALEN

DANSK INSTITUT FOR MATEMATIKMASKINER

DASK - BIBLIOTEKSSPECIFIKATION

PROGRAM-
BETEGNELSE

M 17

side 1/9

Kodet af H.B.H. d. 1.10.58

Indkørt af H.B.H. d. 15.11.58

Udgivet d. 1.4.59

Reelle, symmetriske matricer:

Best. af egenverdier og egen-
vektorer ($2 \leq n \leq 15$)

Programmet beregner egenverdier alene eller egenverdier med tilhørende egenvektorer for reelle, symmetriske matricer af indtil 15. orden ved Jacobis metode.

Først udskrives som kontrol den indlæste matrix, og derefter følger de beregnede egenverdier evt. med tilhørende egenvektorer.

Til imødegaaelse af fejl findes kontrol af saavel indlæsning, beregningsgang som udlæsning.

Regnetiden er stort set proportional med 3. potens af ordenen, men afhænger desuden stærkt af den forlangte nøjagtighed og forholdet mellem matrixens elementer i og uden for diagonalen. For en almindelig matrix af 8. orden og med rimeligt nøjagtigheds - krav er den samlede køretid af størrelsesordenen 2 minutter.

Grundlag

Programmet løser egenværdiproblemet

$$A_1 \cdot u = \lambda \cdot u,$$

hvor A_1 er den givne matrix, λ er en egenværdi og $u \neq 0$ er den tilhørende egenvektor, ved hjælp af Jacobis metode, der i korthed går ud på følgende:

Ud fra den givne matrix A_1 , der forudsættes reel og symmetrisk af n 'te orden, beregnes en følge af matrixer ved hjælp af iterationsformlen

$$(1) \quad A_{k+1} = \tilde{U}_k \cdot A_k \cdot U_k \quad (k = 1, 2, 3, \dots).$$

\tilde{U}_k er den transponerede af U_k .

U_k , som er ortogonal af n 'te orden med determinanten -1 , bestemmes ved hver iteration således, at det numerisk største element udenfor diagonalen i A_k reduceres til 0. Følgen af matrixer A_k vil da konvergere imod en diagonalmatrix D , hvis diagonal vil indeholde egenværdierne for A_1 , mens søjlerne i den resulterende ortogonale transformation $U = U_1 \cdot U_2 \dots$ vil udgøre et sæt hertil hørende egenvektorer. Sammenhængen mellem egenværdier og egenvektorer er sådan, at til $\lambda_1 = d_{11}$ hører første søjle i U , til $\lambda_2 = d_{22}$ anden søjle i U o. s. v.

Transformationsmatrixerne U_k er opbygget på følgende måde:

Først opbygges en enhedsmatrix E af ordenen n . Ønskes nu elementet a_{ij} i A_k bortskaffet, ændres elementerne med indices ii , ij , ji og jj i E , idet der opbygges en undermatrix af 2. orden af formen

$$\begin{Bmatrix} U_{ii} & U_{ij} \\ U_{ji} & U_{jj} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ \sin \alpha & -\cos \alpha \end{Bmatrix},$$

mens de øvrige elementer forbliver uændret. Transformationsvinklen beregnes af formelen:

$$\alpha = \frac{1}{2} \operatorname{Arctan} \frac{2a_{ij}}{a_{ii} - a_{jj}},$$

Iterationsprocessen (1) fortsættes, indtil $|a_{ij}|_{\max} \leq \epsilon_1 \quad (i \neq j)$, hvor ϵ_1 er en opgiven størrelse.

Funktion

Nedenfor følger en detaljeret beskrivelse af program-
mets funktion. For overskuelighedens skyld er beskrivelsen
opdelt i forskellige afsnit omhandlende:

1. Hulning af datastrimmel
2. Trykning
3. Nøjagtighed
4. Køretid
5. Betjening
6. Kontrol

1. Hulning af datastrimmel.

Den matrix, for hvilken beregningerne ønskes udført, hules på hul-
strimmel tilligemed forskellige parametre efter konventionerne på næste side.
Som det ses, kan man få løst flere problemer efter hinanden; man indleder
blot hver ny opgave med etiketten o E9 3. Når samtlige opgaver er hullet, af-
sluttes strimlen med etiketten c EA4o. Indgangsdata for den enkelte opgave
faldet i to grupper: instruktioner til programmet og selve matricen. Hver
gruppe afsluttes med et E.

S ymbolerne har følgende betydninger:

0 E9 3	
a A 00	a : opgavenummer.
n A 00	n : matricens orden.
ϵ_1	ϵ_1 : det numerisk største element, som kan tillades udenfor diagonalen i den resulterende "diagonalmatrix". ϵ_1 hulles efter samme regler, som elementerne i matricen (s. d.)
e A 0m	
p A 00	
BsOhbd	e : antal elementer pr. linie ved trykning.
E	m : antal mellemslag mellem elementerne.
$\{A_1\}$	p : valg af normering for egenvektorer.
E	s : valg af talform.
0 E9 3	h : antal heltalscifre.
a A 00	b : antal betydende cifre.
n A 00	d : antal decimaler.
ϵ_1	Betydningen af e, m, s, h, b og d findes nærmere beskrevet i afsnittet "Trykning".
e A 0m	
p A 00	$\{A_1\}$ symbolisere selve matricen. Denne hules efter følgende regler:
BsOhbd	
E	Da der kun kan være tale om symmetriske matricer, hules kun elementerne i og over diagonalen. Disse hules rækkevis som flydende pakkede tal, d. v. s.
$\{A_2\}$	
E	
:	plus hules som C
:	minus hules som D
:	
.	komma hules som D
:	og hvert tal afsluttes med et A. En eventuel tipotens hules efter tallet, men inden det afsluttende A. Tallet 0 hules som to A'er.
:	
0 EA 40	

Eksempel:

Matricen

$$\begin{pmatrix} 2,35 & -5,71 \cdot 10^{-1} & 0 \\ -5,71 \cdot 10^{-1} & -7,03 & 0,25 \\ 0 & 0,25 & 3 \cdot 10^4 \end{pmatrix}$$

hulles på følgende måde:

02D35A

D5D71D1A

AA

D7D03A

CD25A

03DC4A

Iøvrigt findes på Regnecentralen et program, der ved indlæsning af en strimmel, hvorpå tallene er hullet med fortegn og komma svarende til 5-huls-indlæsning, fremstiller en ny strimmel med de nødvendige bogstavsymboler svarende til 4-huls-indlæsning. For store matricer kan det være en fordel at bruge dette program for at spare en del af hullearbejdet.

2. Trykning.

Umiddelbart efter indlæsningen udskrives opgavenummeret med en stjerne på hver side. Derefter følger den af de indlæste elementer dannede symmetriske matrix. Den typografiske opstilling af matrixens elementer bestemmes af parametrene e og m , idet matricen udskrives med e elementer pr. linie og med m mellemslag mellem elementer på samme linie.

Udskriften af egenverdier og egenvektorer styres af parameteren p . Der er følgende muligheder:

$p = 0$: Kun egenverdierne beregnes; udskriften sker med e egenverdier pr. linie og m mellemslag mellem egenverdier på samme linie. Til sidst udskrives

$p \neq 0$: Sammenhørende egenverdier og egenvektorer udskrives i grupper med ekstra vognretur mellem de enkelte grupper. En gruppe består af en egenverdi, som står på en linie for sig, samt en tilhørende egenvektor udskrevet med e elementer pr. linie og m mellemslag mellem elementer på samme linie. Egenvektorernes normering bestemmes af p efter følgende konventioner:

$p = 1$: Kvadratroden af kvadratsummen af elementerne lig med 1.

$p = 2$: Det første element lig med 1.

$p = 3$: Det numerisk største element lig med ± 1 .

Til sidst udskrives ϵ_1 samt resultatet af kontrolberegningen (se nærmere side 8).

Trykformen af de enkelte tal i såvel matrix som egenverdier og egenvektorer, bestemmes af parametrene s , h , b og d .

s bestemmer talformen, idet

$s = 8$ giver udskrift uden tipotens, mens

$s = A$ giver udskrift med evt. tipotens.

h , b , og d er bestemmende for cifferantallet, idet

h er antallet af heltalscifre,

b er antallet af betydende cifre,

d er antallet af decimaler.

For yderligere oplysninger, se : Lærebog i kodning for DASK side 15.14.

3. Nøjagtighed.

Den maksimale fejl ϵ_2 kan vurderes ved følgende ulighed:

$$\epsilon_2^2 \leq \sum_i |\lambda_i - a_{ii}|^2 \leq \sum_{i \neq j} a_{ij}^2.$$

Man har derfor

$$\epsilon_2 \leq \left(\sum_{i \neq j} a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq (n(n-1) a_{ij\max}^2)^{\frac{1}{2}} < n \cdot a_{ij\max} \leq n \cdot \epsilon_1,$$

hvor ϵ_1 er parameteren på datastrimmelen.

Vælges derfor

$$\epsilon_1 = \frac{\epsilon_2}{n},$$

bliver fejlen på de beregnede egenverdier mindre end ϵ_2 .

Fejlen på egenvektorerne vil i almindelighed være større end fejlen på egenværdierne, ~~til a.~~ på grund af afrundingsfejl ved de mange matrixmultiplikationer, der må udføres ved dannelsen af den resulterende transformationsmatrix U .

Jo strengere krav, man stiller, des længere tid tager beregningerne. Dette mærkes især ved store matricer, idet der her er større sandsynlighed for, at et element, der tidligere er reduceret til nul, ved en senere iteration igen bliver forskelligt fra nul. Man bør derfor ikke vælge ϵ_1 mindre end strengt nødvendigt.

NB. Programmet regner med flydende pakkede tal, altså med en nøjagtighed på mellem 10^{-8} og 10^{-9} på den enkelte operation. Stilles større nøjagtighedskrav ved valget af ϵ_1 , bliver maskinen normalt enten aldrig færdig med iterationerne eller giver forkerte resultater.

4. Køretid.

Køretiden afhænger for den enkelte matrix af dennes orden, den forlangte nøjagtighed samt matricens elementer. Denne afhængighed er imidlertid ikke så simpel, at der kan opskrives et eksplicit udtryk for køretiden. Målinger foretaget med nogle matricer frembragt ved hjælp af tilfældige tal udviser en afhængighed af ordenen i potensen ca. 3; målingerne viser endvidere, at køretiden er meget afhængig af ϵ_1 , idet den i nogle intervaller stiger stærkt med faldende ϵ_1 og i andre intervaller er nogenlunde konstant. Hvor på ϵ_1 -skalaen de konstante intervaller ligger, afhænger af matricens elementer. Det er derfor på forhånd vanskeligt at udtale sig om hvor lang tid en given beregning vil tage, men som et eksempel på størrelsesordenen af tiden for et ret vanskeligt tilfælde kan nævnes, at beregningen af egenværdier og egenvektorer for en matrix af 8. orden uden nul-ler udenfor diagonalen og med alle elementer beliggende i intervallerne $\frac{1}{2} < |a_{ij}| < 30$ med $\epsilon_1 = 10^{-3}$ tog ca. $2\frac{1}{2}$ min.

Sættes $p = 0$, overspringes beregningen af egenvektorerne; herved formindskes køretiden til ca. $\frac{2}{3}$ af tiden for $p \neq 0$.

5. Betjening.

Med hensyn til betjeningen, henvises til den vejledning, der forefindes på Regnecentralen.

6. Kontrol.

For om muligt at afsløre eventuelle fejl i indgangsmaterialet eller eventuelle maskinfejl under beregningen, findes der i programmet forskellige kontrolforanstaltninger. Nogle af disse kontroller - nemlig de, der kontrollerer fejl, der umuliggør programmets gennemløb - giver ved fejl udskrift på både skrivemaskinen og perforatoren, hvorefter programmet automatisk fortsætter med næste tilfælde. På skrivemaskinen trykkes opgavens nummer og fejlens nummer med bindestreg imellem, og på perforatoren trykkes F. og fejlens nummer. Der er følgende muligheder:

Fejl nr.	Fejl
1	Gal trimning af udlæseprogrammet
2	Galt antal elementer i matrioen
3	Overskridelse af det flydende interval

Ud fra de indlæste tal, hvis antal kontrolleres (der skal være $\frac{1}{2} n (n + 1)$, hvor n er ordenen) dannes den tilsvarende symmetriske matrix, der med det samme hules ud på perforatoren således at den senere kan kontrolleres.

Efter at beregningerne er udført og resultatet trykt, udføres en kontrolberegning af de fundne egenverdier og egenvektorer. Denne kontrolberegning udføres dog kun, såfremt både egenverdier og egenvektorer er fordret beregnet ($r \neq 0$).

Idet den givne matrix A tænkes opdelt i rækkematrixer og transformationsmatrixen U tænkes opdelt i søjlematrixer (hvor hver søjlematrix altså udgør en egenvektor), fås af definitionen på et matrixprodukt:

$$A \cdot U = \begin{Bmatrix} A_{1.} \\ A_{2.} \\ \vdots \\ A_{n.} \end{Bmatrix} \{U_{.1} \quad U_{.2} \quad \dots \quad U_{.n}\} = \begin{Bmatrix} A_{1.} U_{.1} & A_{1.} U_{.2} & \dots & A_{1.} U_{.n} \\ A_{2.} U_{.1} & A_{2.} U_{.2} & \dots & A_{2.} U_{.n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n.} U_{.1} & A_{n.} U_{.2} & \dots & A_{n.} U_{.n} \end{Bmatrix}$$

Heraf ses, at:

$$A \cdot U = U \cdot \Lambda,$$

hvor

$$\Lambda = \begin{Bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{Bmatrix}.$$

Hvis beregningerne er udført fejlfrit, skal derfor det numerisk største element i matricen

$$C = A \cdot U - U \cdot \Lambda$$

være af samme størrelsesorden som det valgte ϵ_1 . Som resultat af denne kontrol trykkes ϵ_1 og $|c_{ij}|_{\max}$. Såfremt kontrollen ikke kan gennemføres ($p \neq 0$), trykkes ϵ_1 , således at man kan se, at maskinen har regnet med den ønskede værdi.

Under hulningen summeres alle de cifre, som perforatoren får ordre om at hulle; den herved dannede kontrolsum hules sidst på strimmelen således at man senere ved hjælp af et dertil indrettet kontrolprogram kan kontrollere, om perforatoren har hullet rigtigt.